

**Table. S1** Unit-cell and atom position parameters for rutile and TiO<sub>2</sub> II

Rutile			TiO <sub>2</sub> II		
<i>a</i>		4.5969(5)	<i>a</i>		4.5090(46)
<i>c</i>		2.9607(3)	<i>b</i>		5.4495(60)
<i>V</i>		62.564(15)	<i>c</i>		4.8814(48)
Space group		<i>P4<sub>2</sub>/mnm</i>	<i>V</i>		119.9(2)
			Space group		<i>Pbcn</i>
Ti	<i>X</i>	0.0	<i>X</i>		0.0
	<i>Y</i>	0.0	Ti	<i>Y</i>	0.1743(40)
	<i>Z</i>	0.0		<i>Z</i>	0.25
O	<i>X</i>	0.3055(22)		<i>X</i>	0.2705(84)
	<i>Y</i>	0.3055(22)	O	<i>Y</i>	0.3905(91)
	<i>Z</i>	0.0		<i>Z</i>	0.4197(12)